UNIVERSITE CADI AYAD
FACULTE DES SCIENCES SEMLALIA
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
MARRAKECH

ANNEE UNIVERSITAIRE 2013/2014

SMP / S4

MÉCANIQUE QUANTIQUE
Exercices complémentaires de la Série 2

Exercice 1 : Evolution d'un paquet d'ondes gaussien

On considère une particule libre de masse m que l'on décrit par un paquet d'ondes (à une dimension) défini par :

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k_x)\, e^{i\left[k_x.x-\omega(k_x).t\right]}\, dk_x$$

1) Montrer que $\Psi(x,t)$ est solution de l'équation de Schrödinger.

2) On suppose que $g(k_x)$ est une gaussienne centrée sur k_{x_0} ; soit :

$$g(k_x) = A.\exp[a^2(k_x-k_{x_0})^2]/4 \quad \text{avec } A=\frac{\sqrt{a}}{(2m)^{3/2}}$$ et a est homogène à une distance.

a) Montrer que la probabilité de présence de la particule est indépendant du temps.

b) En utilisant la forme ci-dessus de $g(k_x)$, on obtient après intégration, l'expression suivante pour $\Psi(x)$ (à un facteur de phase près) :

$$\Psi(x,t) = \left[\frac{2a^2}{\pi\alpha(t)}\right]^{\frac{1}{4}} \mathbf{exp}\left(\frac{\varphi^2(x,t)}{Z(t)}\right)$$

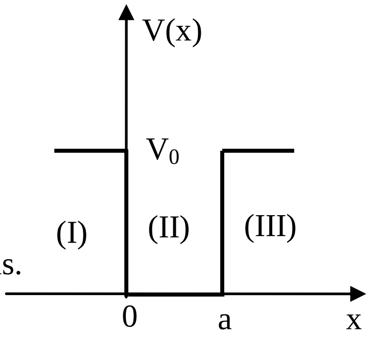
avec $\alpha(t)=a^4+\frac{4\hbar t^2}{m^2}$; $\varphi(x,t)=x-\frac{\hbar k_{x_0} t}{m}$ et $Z(t)=a^2+i\frac{2\hbar t}{m}$

i) Calculer la densité de probabilité. ***ii)*** En déduire la vitesse du groupe v_g.

3) Retrouver v_g en considérant la relation de dispersion $\omega(k_x)$. Comparer v_g à la vitesse de phase v_φ et à la vitesse v de la particule. Conclure.

Exercice 2 : Puits de potentiel

Soit une particule de masse m d'énergie E se trouve piégée dans un puits de potentiel carré de la figure ci-contre tel que $0<E<V_0$



1) V_0 fini

- **a)** Résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire dans les trois régions.
- **b)** Donner la signification physique de chaque terme.
- **c)** Expliciter les conditions de continuités aux points x=0 et x=a.
- **d)** Déduire la condition à la quelle doivent satisfaire les quantités k, ρ et a, où k et ρ sont définies comme suit : $k^2=2mE/\hbar^2$ et $\rho^2=2m(V_0-E)/\hbar^2$.

2) V_0 infini

Si V_0 tend vers l'infini :

a) Que deviennent les solutions de l'équation de Schrödinger dans les régions (I) et (III)?

b) En écrivant les conditions de continuité aux points x=0 et x=a, déduire les valeurs possibles de l'énergie E de la particule dans le puits. Conclure.

c) Généraliser à trois dimensions et retrouver les énergies de la particule et les fonctions d'onde associées. Donner la dégénérescence des 5 premiers niveaux d'énergie.

Corrigé des Exercices complémentaires de la série 2

SMP/S4 A. KADDOURI (1/4)

EX.1

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k_x)\, e^{i(k_x\cdot x-\omega t)}\, dk_x \qquad \omega=\omega(k_x)$$

1°) Eq. de Schrö. pour particule libre

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) \quad \text{à vérifier ?}$$

on a :

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int -i\omega\, g(k_x)\, e^{i(k_x\cdot x-\omega t)}\, dk_x \qquad (1)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int -k_x^2\, g(k_x)\, e^{i(k_x\cdot x-\omega t)}\, dk_x \qquad (2)$$

(1) $\times(-i\hbar)$ et (2) $\times\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)$ et ajoutons membre à membre, on aura :

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\omega t\right) g(k_x)\, e^{i(k_x\cdot x-\omega t)}\, dk_x \qquad (3)$$

or $E=\hbar\omega$ et $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ $\Rightarrow$ $\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\hbar\omega=\frac{p^2}{2m}-E$

Pour particule <u>libre</u> $E=E_c=\frac{1}{2}mv^2=\frac{p^2}{2m}$ $\Rightarrow$ Second membre de (3) est identiquement <u>nul</u>

$$\Rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) \quad = \text{Eq de Schrö pour particule libre.}$$

2°) $g(k_x)=A\,e^{-\frac{a^2}{4}(k_x-k_{x_0})^2}$

a) on sait que $\int|\Psi(x,t)|^2dx=\int|G(k_x,t)|^2dk_x$ avec $G(k_x,t)=g(k_x)\,e^{-i\omega t}$

$\Rightarrow$ $|G(k_x,t)|^2=|g(k_x)|^2=A^2e^{-\frac{a^2}{4}(k_x-k_{x_0})^2}$ indépendant du temps

et donc $\int|\Psi(x,t)|^2dx$ est aussi indépendant du temps

b) $\Psi(x,t) = \left(\frac{2a^2}{\pi\alpha(t)}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{\varphi^2(x,t)}{Z(t)}\right)$ (2/4)

i) $|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2a^2}{\pi\alpha(t)}\right)^{1/2} \left|\exp \frac{\varphi^2(x,t)}{Z(t)}\right|^2$

avec $\left|e^{\frac{\varphi^2}{Z}}\right|^2 = \left(e^{\varphi^2/Z}\right)\left(e^{\varphi^2/Z}\right)^* = e^{+\varphi^2\left(\frac{1}{Z}+\frac{1}{Z^*}\right)}$

avec $Z = a^2 + i\frac{2\hbar t}{m} \Rightarrow Z^* = a^2 - i\frac{2\hbar t}{m} \Rightarrow \frac{1}{Z}+\frac{1}{Z^*} = \frac{2a^2}{a^4+4\frac{\hbar^2t^2}{m^2}} = \frac{2a^2}{\alpha(t)}$

$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2a^2}{\pi\alpha(t)}\right)^{1/2} . \exp\left(\frac{2a^2\varphi^2(x,t)}{\alpha(t)}\right)$

avec $\varphi(x,t) = x - \frac{\hbar k_{x_0}}{m}. t$

ii) vitesse du groupe = vitesse du Centre du paquet

le centre = point d'abscisse $x = x_m$ pour lequel $|\Psi(x,t)|^2$ est maximum

$|\Psi(x,t)|_{max} \Rightarrow \frac{d}{dx}|\Psi(x,t)| = 0 \Rightarrow \frac{d}{dx}\left[\exp\left(\frac{a^2\varphi^2(x,t)}{\alpha(t)}\right)\right] = 0$

$\Rightarrow \varphi(x,t)\Big]_{x=x_m} = 0 \Rightarrow x_m = \frac{\hbar k_{x_0}}{m} t$

$v_g = \frac{dx_m}{dt} \longrightarrow v_g = \frac{\hbar k_{x_0}}{m}$.

3) Particule libre : $E = E_C = \frac{p^2}{2m}$ avec $E = \hbar\omega$ et $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

$\Rightarrow \omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (relation de dispersion).

le paquet : $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i\phi} dk$ avec $\phi = k.x - \omega(k)t$

• vitesse de groupe v_g est telle que $\frac{d\phi}{dk}\Big|_{k=k_0} = 0 \Rightarrow x - \frac{d\omega}{dk}t = 0$

$\Rightarrow x = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0} . t$ soit $v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$

• vitesse de phase v_φ est telle que $\frac{d\phi}{dt} = 0$

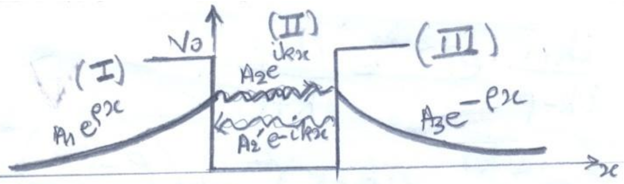
$\Rightarrow k_0\frac{dx}{dt} - \omega = 0 \longrightarrow v_\varphi = \frac{\omega}{k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m}$

• vitesse v de la particule est telle que $p = mv \Rightarrow v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k_0}{m}$.

$\Rightarrow$ la vitesse v de la particule s'identifie à la vitesse de groupe v_g

SMP/S4

EX.2



(3/4)

A. KADDOURI

__V_0 fini__ avec $E < V_0$

région I : $\frac{d^2}{dx^2}\varphi_I(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\varphi_I(x) = 0$

$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_I(x) - \rho^2\varphi_I(x) = 0$ avec $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0$.

région III : m̂ éq. $\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{III}(x) - \rho^2\varphi_{III}(x) = 0$

$\Longrightarrow \varphi_I(x) = A_1 e^{\rho x} + B_1 e^{-\rho x}$ et $\varphi_{III}(x) = A_3 e^{\rho x} + B_3 e^{-\rho x}$.

φ_I et φ_{III} doivent être bornées $\rightarrow B_1 \equiv 0$ et $A_3 \equiv 0$.

~~soit~~ $\varphi_I(x) = A_1 e^{+\rho x}$ et $\varphi_{III}(x) = B_3 e^{-\rho x}$.

φ_I → onde évanescente ; φ_{III} → onde évanescente

région II : $\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\,\varphi_{II}(x) = 0$; $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E > 0$ car $E > 0$

$\rightarrow \varphi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}$.

($A_2 e^{ikx}$ → φ incident ; $B_2 e^{-ikx}$ → φ réfléchie)

Continuité :

$x = 0 \rightarrow \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \Rightarrow A_1 = A_2 + B_2 \Rightarrow A_2 + B_2 = A_1$ ①

et $\varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) \Rightarrow \rho A_1 = ikA_2 - ikB_2 \Rightarrow A_2 - B_2 = \frac{\rho}{ik}A_1$ ②

$x = a \rightarrow \varphi_{III}(a) = \varphi_{II}(a) \Rightarrow A_3 e^{-\rho a} = A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika}$ ③

$\varphi_{III}'(a) = \varphi_{II}'(a) \Rightarrow -\rho A_3 e^{-\rho a} = ikA_2 e^{ika} - ikB_2 e^{-ika}$ ④

③ $\times \rho \Rightarrow \rho A_3 e^{-\rho a} = \rho A_2 e^{ika} + \rho B_2 e^{-ika}$ ③'

③' + ④ $\Rightarrow 0 = A_2 e^{ika}(\rho + ik) + B_2 e^{-ika}(\rho - ik)$

$\Longrightarrow \frac{A_2 e^{ika}}{B_2 e^{-ika}} = -\frac{\rho - ik}{\rho + ik} \Rightarrow \frac{A_2}{B_2}e^{+2ika} = -\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = \frac{ik - \rho}{ik + \rho}$ ⑤

$\frac{A_2}{B_2} = ?$ ① + ② $\Rightarrow 2A_2 = A_1\left(1 + \frac{\rho}{ik}\right)$

① − ② $\Rightarrow 2B_2 = A_1\left(1 - \rho/ik\right)$

$\Rightarrow \frac{A_2}{B_2} = \frac{1 + \rho/ik}{1 - \rho/ik} = \frac{ik + \rho}{ik - \rho}$ ⑥

4/4

⑥ dans ⑤ $\Rightarrow \frac{ik+\rho}{ik-\rho} e^{+2ika} = \frac{ik-\rho}{ik+\rho}$.

soit
$$e^{+2ika} = \left(\frac{ik-\rho}{ik+\rho}\right)^2 = \left(\frac{\rho-ik}{\rho+ik}\right)^2$$

2 solutions : $\frac{\rho-ik}{\rho+ik} = e^{ika}$ ou $\frac{\rho-ik}{\rho+ik} = -e^{ika}$ $\hookrightarrow \rho/k = tg(ka/2)$.

V_0 infini

La fonctions d'onde à l'extérieur du potentiel est nulle car la probabilité de présence à l'extérieur est nulle $\Rightarrow$ classiquement ce cas correspond à une particule confinée dans l'intervalle $0 \leq x \leq a$ mais peut avoir n'importe quelle énergie ≥ 0.

Quantiquement :
$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{II}(x) + k^2\varphi_{II}(x) = 0 \quad \text{avec } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$$
$$\Rightarrow \varphi_{II}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Dans I et III pas de particule donc $\varphi_I = \varphi_{III} = 0$.

Condition de continuité : $\varphi_{II}(0) = \varphi_I(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow A = -B$

$\varphi_{II}(a) = \varphi_{III}(a) = 0 \Rightarrow A e^{ika} - A e^{-ika} = 0$

avec $A = -B \Rightarrow 2iA \sin ka = 0$

$\Rightarrow \sin ka = 0 \Rightarrow ka = n\pi$ or $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$

et donc
$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 = \mathcal{E}.n^2 \quad \text{avec } n = 1, 2, 3 \ldots$$
et $\mathcal{E} = E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$

et $\varphi_{II}(x) = \varphi_n(x) = C \sin\frac{n\pi}{a}x$ et C est telle que $\int|\varphi(x)|^2 = 1$

possède des zéros tel que : $\varphi(x) = 0 \Rightarrow \frac{n\pi}{a}x_0 = m\pi \Rightarrow x_0 = \frac{m}{n}a$.

$n = 1 \Rightarrow m = 0, 1 \rightarrow x_0 = 0, a$

$n = 2 \Rightarrow m = 0, 1, 2 \rightarrow x_0 = 0, \frac{a}{2}, a$

$n = 3 \Rightarrow m = 0, 1, 2, 3 \rightarrow x_0 = 0, \frac{a}{3}, \frac{2a}{3}$

$n = 4 \longrightarrow x = 0, \frac{a}{4}, \frac{a}{2}, \frac{3a}{4}$

Période de λ : $k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{n\pi}a = \frac{2a}{n}$